

課題名 (タイトル) :

## HaRiken Project: Search and Development of Clean Energy Materials

利用者氏名 :

○ 飯高敏晃

Alan Aspuru-Guzik

Mark Watson

Kenta Hongo

Michael Stopa

所属 : 和光研究所 基幹研究所 戒崎計算宇宙物理研究室

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係  
環境・エネルギー問題の解決のために、化学、物理学、材料学に基づいた安価で効率のよい太陽電池、熱電材料、超伝導材料等の探索と開発に大きな期待が寄せられている。
2. 具体的な利用内容、計算方法  
分子結晶は高効率太陽電池の材料の一つとして注目されているが、本研究ではテストケースとして室温で大きな易動度を示すことが知られている para-diodobenzene (pDIB) を取り上げる。pDIB は常温常圧で結晶対称性 Pbcn を示す  $\alpha$  相をとり、加熱により 323K で結晶対称性 Pccn を示す高温相 ( $\beta$  相) に転移することが知られている。密度汎関数法による第一原理計算では、 $\alpha$  相と  $\beta$  相のエネルギーの大小関係が実験結果と逆転するという結果が得られており、より精確な理論的研究が求められている。我々は、エネルギーの不正確さの原因が密度汎関数法で取り入れることが難しい分子結晶中のファンデルワールス力にあると考え、最も精確な第一原理計算法の一つである量子モンテカルロ法を用いて  $\alpha$  相と  $\beta$  相のエネルギー差を精確に求めることを目標とする。分子結晶が多く電子を含むことと問題とするエネルギー差が小さいことのために、量子モンテカルロ法の計算量は膨大なものとなる。本研究では、RICC において大規模並列計算および大規模並列 GPU 計算を活用することにより、この難問に挑戦する。さらに余裕があれば、密度汎関数法による格子力学計算を行い、この分子結晶における熱力学的性質の考察も行う。
3. 結果  
予備計算により  $\alpha$  相と  $\beta$  相の密度汎関数法および量子モンテカルロ法によるエネルギーの概算値を得た。
4. まとめ  
予備計算によりエネルギーの概算値を得たが、最終的な考察を行うに足るだけの収束を得ていない。
5. 今後の計画・展望  
必要な精度を得るための本計算を行う。
6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況 (どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか) や、継続して利用する際に行う具体的な内容  
本年度は予備計算がほぼ終了したので、来年度は本計算を行いたい。本計算の実行には RICC が不可欠である。
7. 一般利用で演算時間を使い切れなかった理由  
RICC のファイルシステム不具合の修復時期の見通しがたたなかったため、予備計算の途中で計算をハーバード大側の計算機に移して、プログラムのチューニング、予備計算等を行った。
8. 利用研究成果が無かった場合の理由  
予備計算で得た知見をまとめた論文を準備中である

